



報道機関各位

令和8年10月19日

国立大学法人 岩手大学

熱力学の教科書の「未解明の空欄」に挑む：室温の超臨界水素が 560 MPa で状態変化することを発見

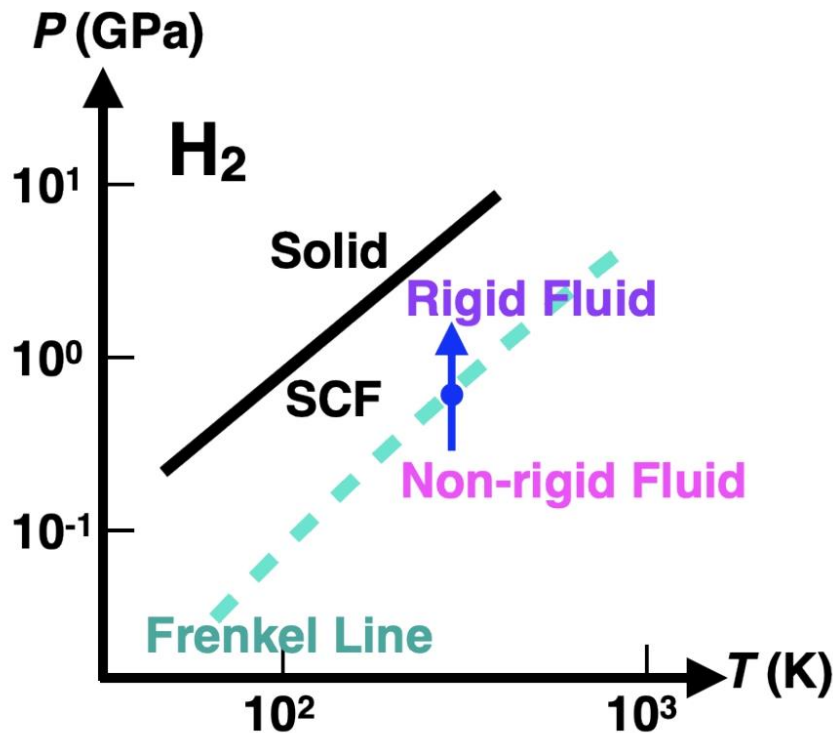
～室温下の動的 12 分子配位状態と緻密化メカニズムを解明・水素技術の最前線へ～

概要

岩手大学理工学部 中山敦子教授らの研究グループは、熱力学の教科書で「未解明の空欄」とされてきた超臨界流体の微視的構造に迫るため、室温下でシンクロトロン放射光 X 線回折実験を行いました。その結果、約 560 メガパスカル (MPa) 付近で状態が移り変わる「クロスオーバー」を確認し、高圧下の超臨界水素が室温環境下においても動的な 12 分子配位状態を形成することを突き止めました。さらに、分子当たりの平均体積の解析から、クロスオーバー後のさらなる高密度化は「単なる分子間距離の短縮」ではなく、主に原子内/分子内のメカニズムによって生じることを明らかにしました。本成果により、高圧・高密度な超臨界水素の物性理解が進むことで、特に産業・エネルギー分野における次世代の水素ストレージ（貯蔵・輸送）や、高効率な触媒反応プロセスの精密設計への貢献が期待されます。

本研究は、令和8年9月30日に米国化学会が発行する、物理化学分野で国際的に評価の高い学術論文誌『The Journal of Physical Chemistry Letters』で公開されました。





(図) 超臨界流体水素の相図

背景

超臨界流体（SCF）は、液体と気体の両方の性質を持つ状態ですが、その内部で物理的性質がどのように変化しているのかは未解明な点が多く残されています。近年、水素（ H_2 ）のSCF相において、特定の圧力下で「状態の切り替わり（クロスオーバー）」や「触媒なしでのオルソーパラ転換」という極めて異例な現象が生じることが分かってきました。しかし、この現象を起こす分子レベルでの構造変化を直接捉えることは技術的に難しく、詳細な解明には至っていませんでした。そこで本研究では、大型放射光施設（SPring-8）を活用し、高圧下における水素分子の集団としての振る舞い（凝集状態）の変化を解明することを目指しました。

研究内容

本研究では、超高压状態を作り出す装置（ダイヤモンドアンビルセル：DAC）の中に高純度水素を充填し、室温環境下で高圧条件（最大 1.12 GPa）を実現しました。この条件下において、大型放射光施設（SPring-8）の強力な X 線（ビームライン BL10XU）を照射し、X 線回折（XRD）測定を実施しました。ダイヤモンド由来のコンプトン散乱など、バックグラウン



ドデータを精密に取り除くことで、弱かった水素由来の信号を抽出し、様々な圧力変化に伴う超臨界水素の構造パターンの変化を正確に取得・可視化しました。

研究成果

本研究により、超臨界状態の水素において構造因子（分子の並び方のデータ）を決定することに成功し、室温・0.56 GPa（ギガパスカル）付近で明確な「状態の切り替わり（クロスオーバー）」が起こることを実証しました。得られたデータから分子同士の距離や平均体積、配位数を算出した結果、このクロスオーバーを経て流体の性質が変化することが判明しました。これにより、境界（フレンケル線）を超えることで、超臨界水素が「非剛性」から「剛性」を持つ液体へと変化していることが構造的に裏付けられました。

今後の展開

超臨界水素において触媒なしで急激に進む「オルソ-パラ転換」は、室温・高圧下における核間相互作用が影響していると考えられていますが、その詳細なメカニズムは未解明のままです。本研究で得られた「高圧下での水素分子の集合状態や構造変化」に関する知見は、このオルソ-パラ転換のメカニズムを解明するための大きな鍵となります。今後は、さらに高精度な構造解析を進めることで、高効率な水素の貯蔵・輸送技術や次世代のエネルギー応用への貢献を目指します。

掲載論文

題 目：A High-Density Supercritical Fluid of H₂

著 者：Atsuko Nakayama, Naoto Fujii, Koji Hirama, Kentaro Hamada, Katsuya Shimizu, Yuki Nakamoto, Satoshi Nakano, Saori Kawaguchi-Imaeda, Yuichi Akahama, Ayako Ohmura

誌 名：The Journal of Physical Chemistry Letters , Vol. 17, No. 41, pp. 11754–11759

公表日：2026 年 9 月 30 日

【用語解説】

- ・ 超臨界流体（SCF: Supercritical Fluid）：物質の臨界点（特定の温度・圧力）を超えた環境下で生じる状態。通常、気体と液体の区別がつかない均一な状態とされるが、圧力や温度によって分子の振る舞いが微小に変化し、「気体的な性質（非剛性）」と、「液体的な性質（剛性）」の境界（フレンケル線）が存在することが近年わかってきた。
- ・ クロスオーバー（crossover）：相転移（気体から液体になるような熱力学的変化）とは異なり、流体の状態や物性が広範囲にわたってスムーズかつ緩やかに切り替わる現象



のこと。

- ・ フレンケル線 (Frenkel Line) : 超臨界流体の中で、「非剛性 (ガス状・非剛性流体)」な状態と、より分子の結びつきが強く液体らしい挙動を示す「剛性 (剛性流体)」な状態を分ける境界概念のこと。
- ・ 大型放射光施設 (SPring-8) : 兵庫県の播磨科学公園都市にある世界最高性能の放射光を生み出す研究施設。光速近くまで加速した電子から発生する極めて明るい X 線 (放射光) を用いて、物質の原子・分子レベルの構造を詳細に観察できる。
- ・ ダイヤモンドアンビルセル (DAC) : 2 つのダイヤモンドの先端で試料を挟み込むことで、最大で数百ギガパスカルという地球深部の超高压状態を実験室内で再現できる小型の実験装置。
- ・ オルソーパラ転換 (オルソ水素・パラ水素) : 水素分子を構成する 2 つの原子核の「スピン (自転)」の向きによる分類。スピンの平行なものを「オルソ水素」、反平行なものを「パラ水素」と呼ぶ。通常はこの 2 つの状態が移り変わる (転換する) には触媒が必要で、数日程度かかるが、高压下では触媒なしで急激に進行することがわかっている。

本研究は、以下の研究事業の成果の一部として得られました。

- ・ 文部科学省科学研究費補助金・基盤研究 (B) 「水素の超臨界流体相で生じるオルソーパラ転換の機構解明」 研究代表者：中山敦子

【本件に関するお問い合わせ】

岩手大学理工学部理工学科数理・物理コース
教授 中山敦子

電 話：019-621-6303 (理工学部代表番号)

メール：atsuko(at)iwate-u.ac.jp

※ (at) を@に変えてお使いください。

